XXIII CAFQI

XXIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

EL CALAFATE 2023

# NITRILOS LIBERADOS EN LA PIRÓLISIS DE ALGAS: REACTIVIDAD CON RADICALES OH Y ÁTOMOS DE CL, MECANISMOS E IMPACTO AMBIENTAL

Sánchez Domínguez, M.V.[1] y Teruel, M A.[1]

[1]Laboratorio Universitario de Química y Contaminación del Aire (LUQCA)- Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC), Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, CP 5000, Córdoba, Argentina. vir.sanchez@unc.edu.ar

**Introducción:** La biomasa algal es una buena candidata para integrarse en los actuales sistemas energéticos y de economía circular a través de la obtención de diversos productos con valor agregado[1]. Una de las técnicas más utilizadas para el tratamiento de esta biomasa es la pirólisis, obteniendo bioaceites, biocarbón y gases no condensables[2]. Compuestos orgánicos Volátiles (COVs) nitrogenados, como isovaleronitrilo (3 metil butanonitrilo) y hexanonitrilo, han sido detectados en las emisiones gaseosas de la pirólisis de material algal (*Scenedesmus quadricauda y Undaria pinnatifida*) con potencial como materia prima para biocombustibles. En este trabajo se realizó un estudio cinético de la degradación de estos dos nitrilos ($CH_3$-$(CH_2)_3$-C≡N y $CH_3$-$(CH_2)_4$-C≡N) iniciado por los principales oxidantes atmosféricos- radicales OH y átomos de Cl- a 298 K y 1 atm. Para esto se empleó un reactor de vidrio Pyrex de 405 L para simular condiciones atmosféricas. Esta investigación reporta experimentos realizados mediante microextracción en fase sólida (SPME) y cromatografía gaseosa con detector de ionización por llama (CG-FID). Las constantes de velocidad se midieron con diferentes compuestos de referencia mediante el método relativo. Aunque existen estudios de las reacciones de los integrantes de esta familia funcional con radicales OH y Cl [3,4], estos fueron realizados con otras técnicas (FTIR) y para compuestos de cadena más corta.

**Resultados:** Se obtuvieron los siguientes resultados para $CH_3$-$(CH_2)_4$-C≡N: $k_{Cl\text{-}CGFID}$= (1,22±0,24) $10^{-10}$ y $k_{OH\text{-}GCFID}$= (2,55±0,51) $10^{-12}$ $cm^3$ $molécula^{-1}s^{-1}$. Para $CH_3$-$(CH_2)_3$-C≡N se obtuvo $k_{Cl\text{-}CGFID}$= (7,09±0.14) $10^{-11}$ $cm^3$ molécula-$^1s^{-1}$. Empleando las constantes determinadas se evaluaron tendencias respecto a otros compuestos similares, se realizaron cálculos de estructura-reactividad (SARS) y diferentes parámetros, como Tiempos de Vida Media Troposférico y Potencial de Creación de Ozono Troposférico (smog fotoquímico).

**Conclusiones:** Las constantes de velocidad determinadas muestran valores comparables con estudios anteriores. La fracción gaseosa resultante del proceso tendría una importancia ambiental si pensamos el escalamiento del proceso a nivel industrial debido a posibles emisiones fugitivas y su interacción con los oxidantes atmosféricos.

**Referencias:**

1) Kumar, M., Sun, Y., Rathour, R., Pandey, A., Thakur, I. S., & Tsang, D. C. *Science of the Total Environment*, **2020**, 716, 137116.

2) Salomon, R., Crevero, M., Rost, E., Carstens, M., Parra, A., & Albarracín, I. *UNED Research Journal*, **2014**, 6(2), 213-221.

3) Nielsen, O. J., Carstens, C. L., Lengkong, J. W., Vo, K. L., Andersen, S. T., & Andersen, M. P. S. *Chemical Physics Letters*, **2017** 688, 7-10.

4) Andersen, S. T., Kyte, M., Andersen, L. L., Nielsen, O. J., & Sulbaek Andersen, M. P. *International Journal of Chemical Kinetics,* **2018**, *50*(11), 813-826.